



TITLE:

新しい材料設計：ハイエントロピー合金

AUTHOR(S):

乾, 晴行; 辻, 伸泰; 新津, 甲大

CITATION:

乾, 晴行 ...[et al]. 新しい材料設計：ハイエントロピー合金. 京都大学アカデミックデイ2019：研究者と立ち話（ポスター/展示） 2019: 44.

ISSUE DATE:

2019-09-15

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/244442>

RIGHT:



ハイエントロピー合金

元素の多様性と不均一性に基づく新しい材料の学理

High Entropy Alloys - Science of New Class of Materials Based on Elemental Multiplicity and Heterogeneity

実用金属とその強化原理



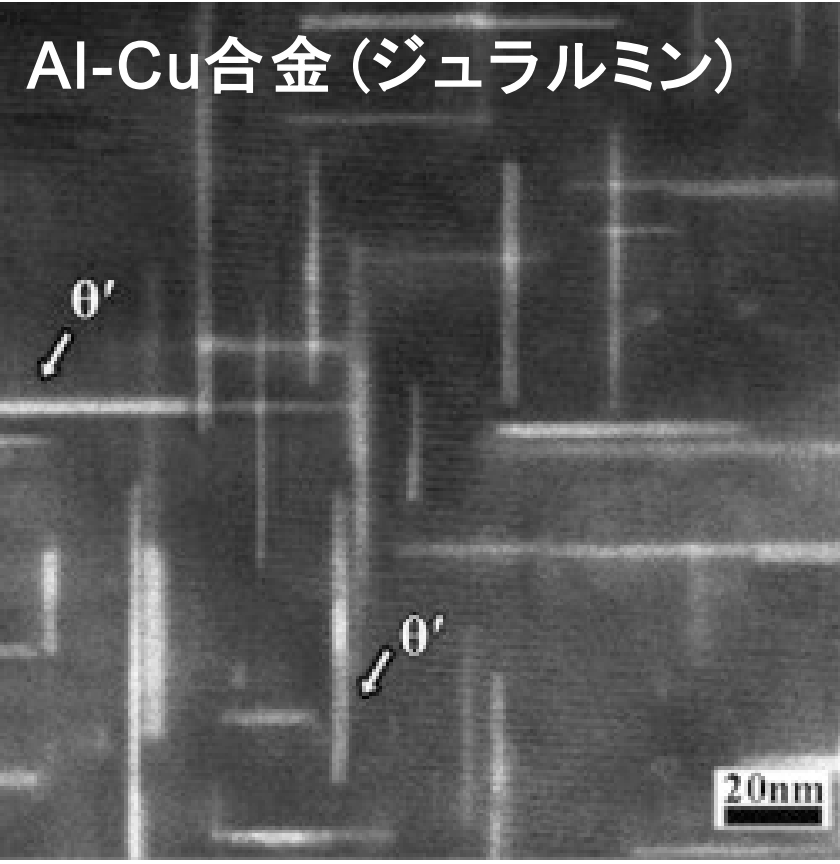
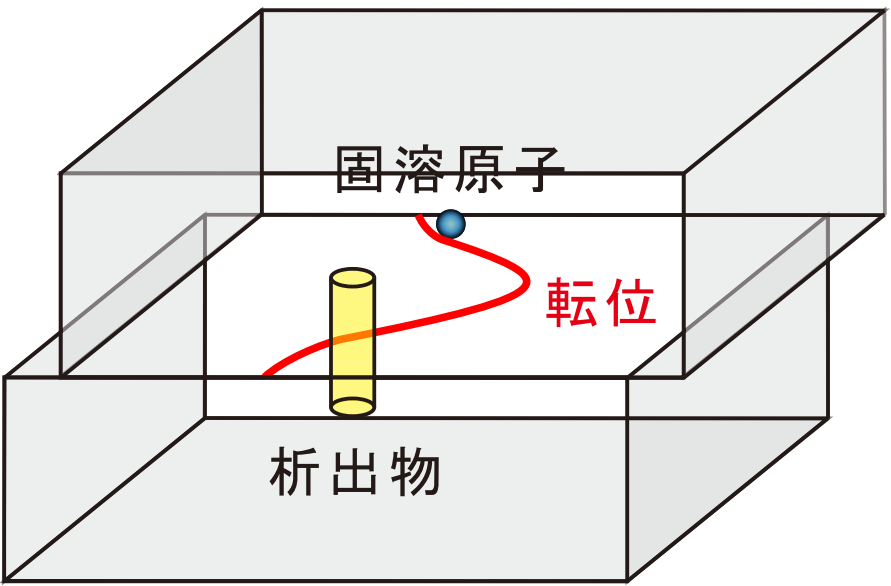
純金属
例) Fe, Mg, Al...
柔らかすぎて
実用化不可能



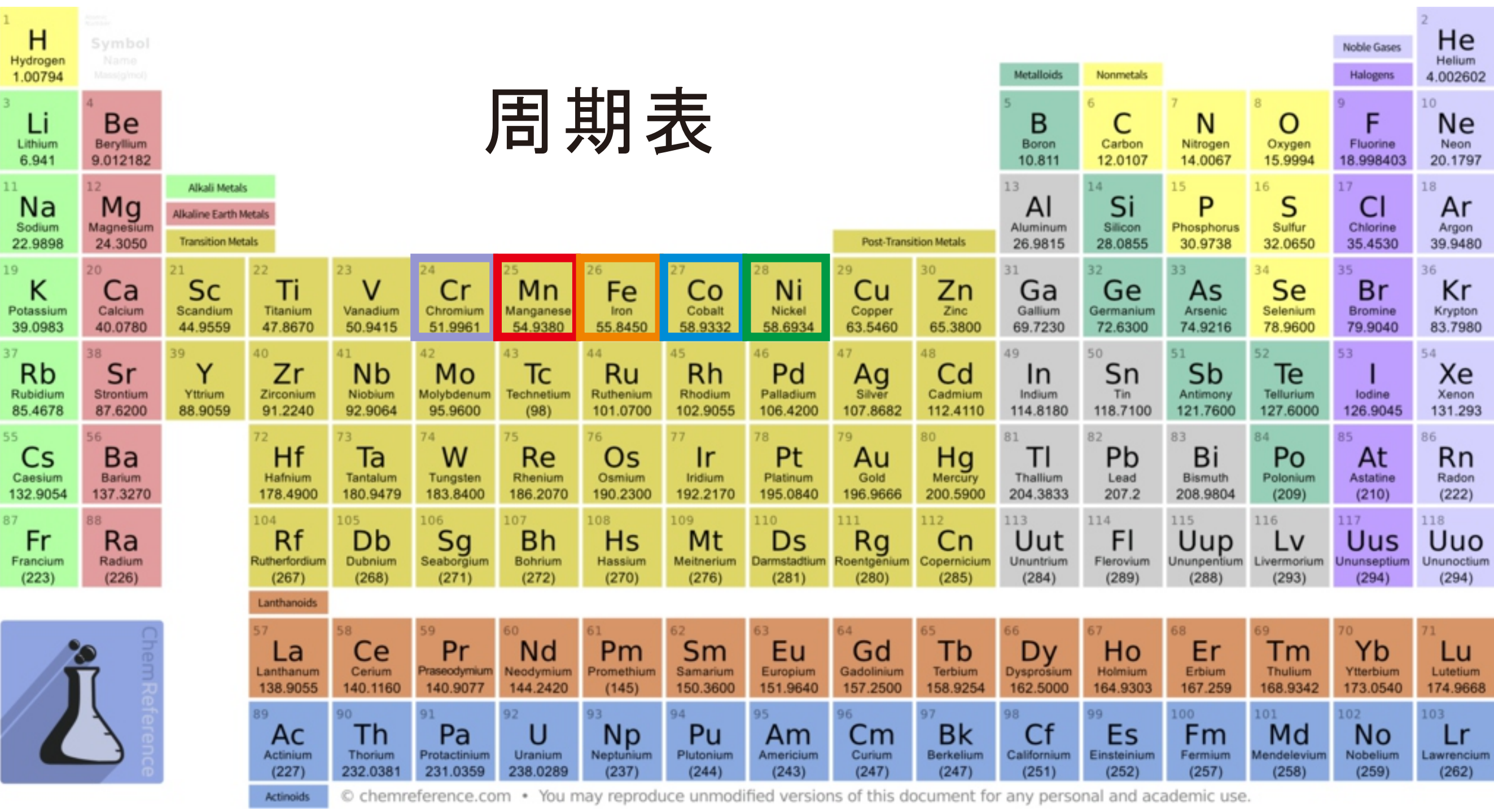
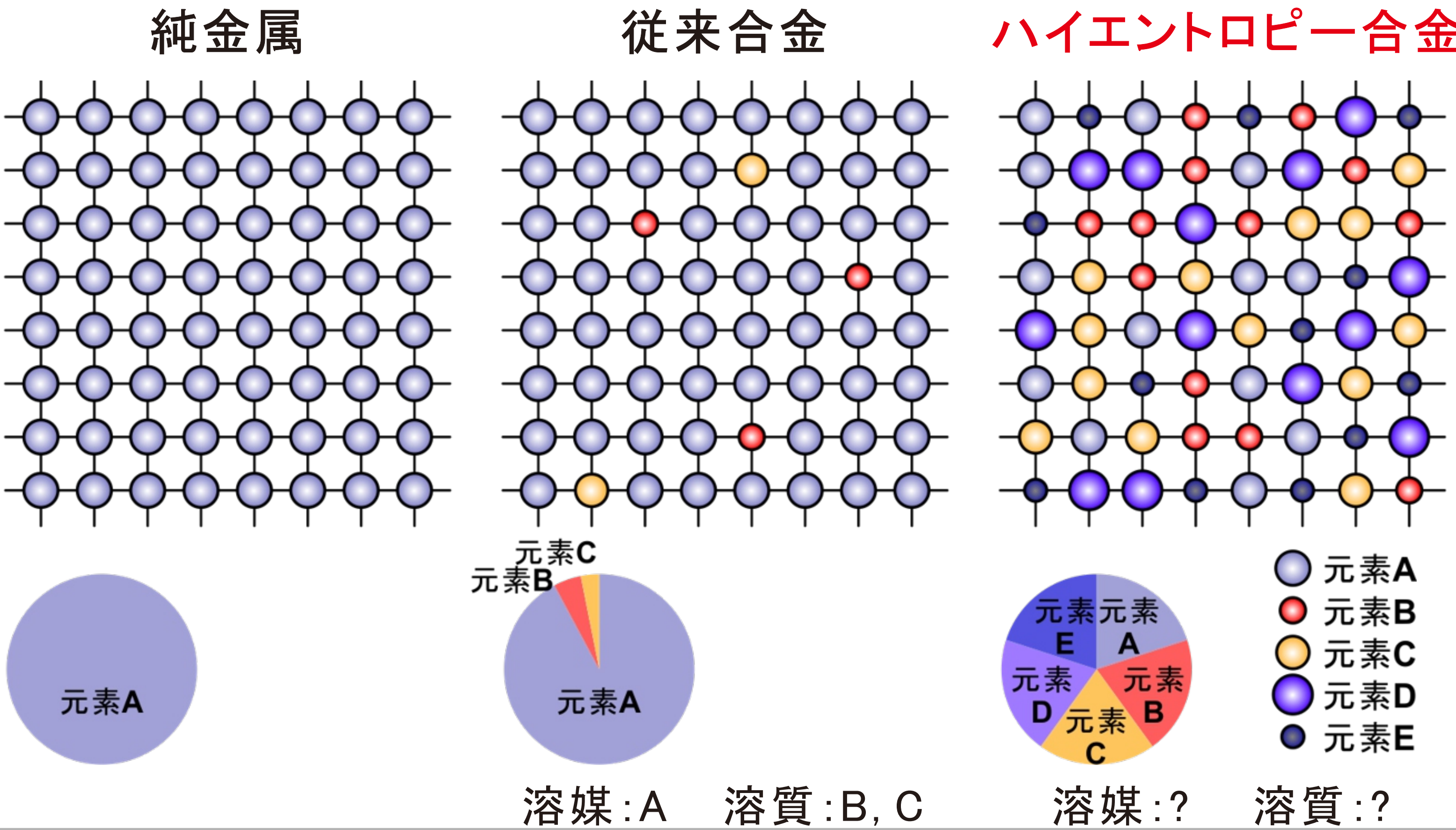
材料の強化原理:
転位が運動する際に結晶から受ける抵抗を増大させること

組織制御

- ・ 固溶化
- ・ 析出
- ・ 結晶粒微細化
- ・ 結晶方位制御 etc..



ハイエントロピー合金とは



多種の元素がランダムに混ざった固体
溶媒と溶質を区別することができない

特徴1: 高い配置のエントロピー

配置のエントロピー($S_{\text{conf.}} = -R \sum n_i \ln(n_i)$)のギブス自由エネルギーへの寄与($G = H - TS$)が大きい
ため化合物形成や相分離を生じにくい

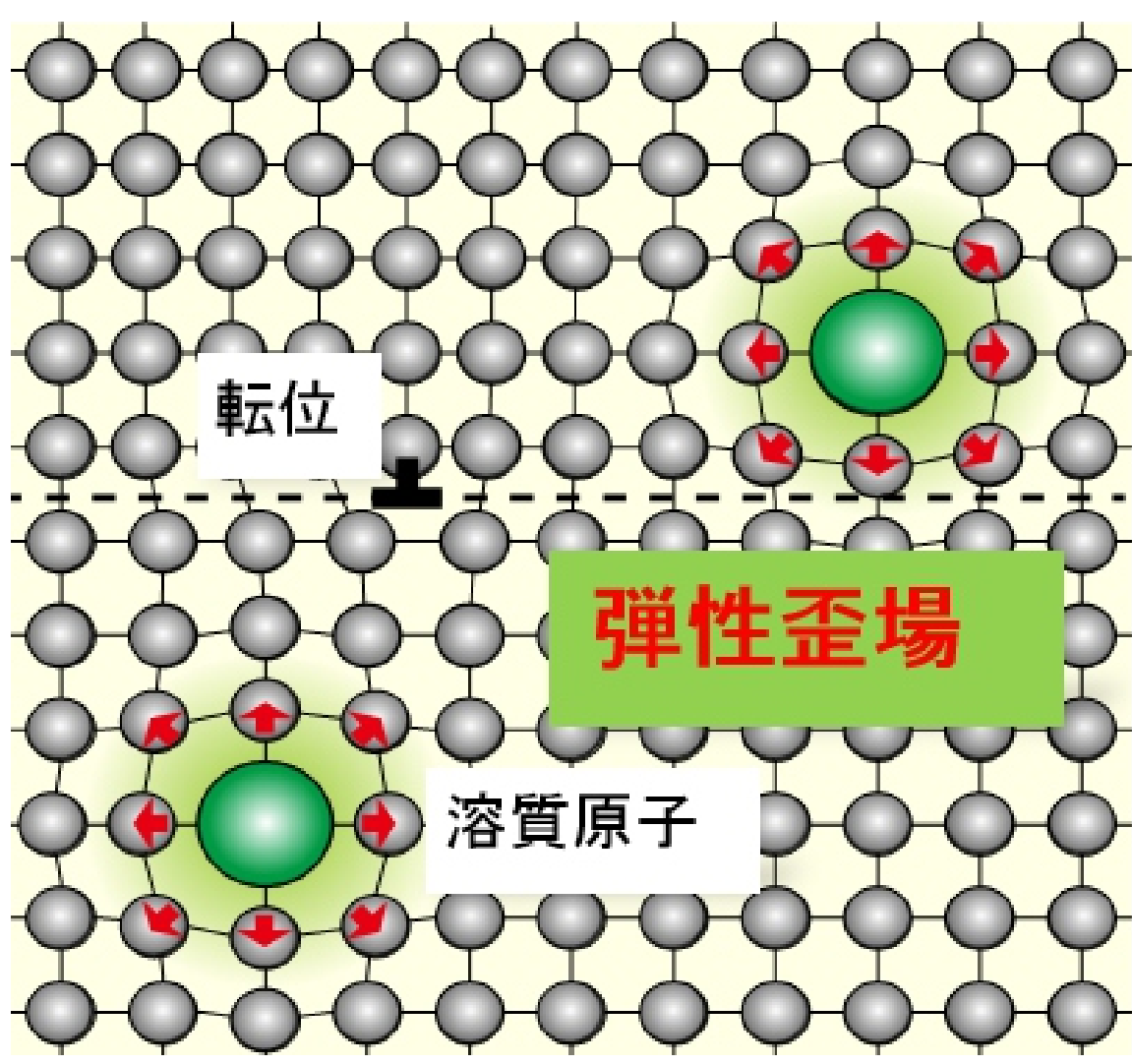
元素数	エントロピー
2	0.69R
3	1.10R
4	1.39R
5	1.61R



小 $S_{\text{conf.}}$ 大

- ハイエントロピー合金の例
- ・ FCC構造: CrMnFeCoNi, CrFeCoNiAl, CrFeCoNiCu (3d遷移金属元素)
 - ・ BCC構造: TiZrNbHfTa, VNbMoTaW, TiZrNbTaAl (4,5,6族元素)
 - ・ HCP構造: YGdTbDyHo, FeCoRuRe, VCoRuRe (含希土類元素)

特徴2: 従来の固溶強化理論の限界



Fleisherモデル

適用合金

超希薄合金

(固溶度 $c < 0.1 \text{ at.}\%$)

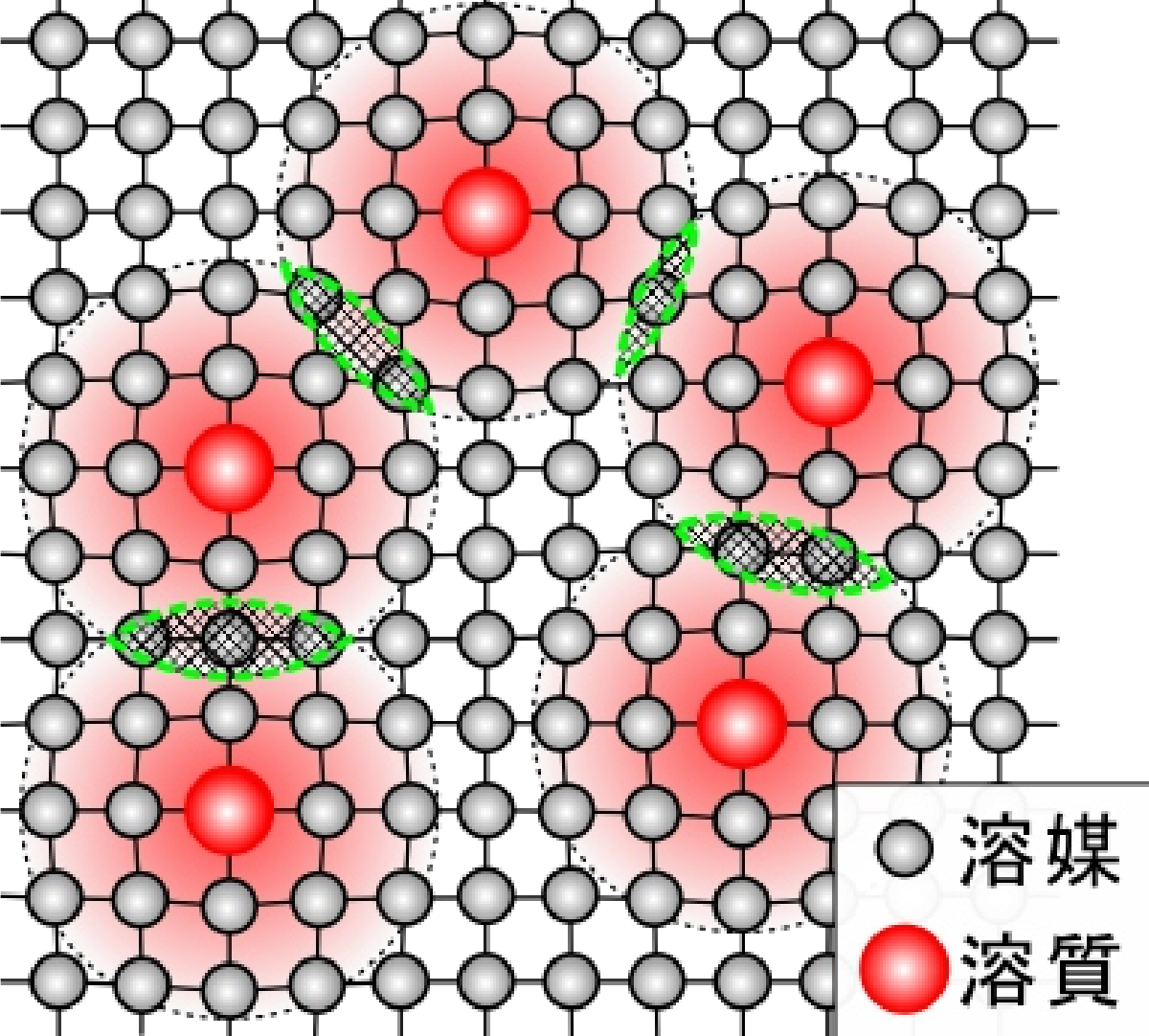
モデルの特徴

- ・ 孤立溶質原子
- ・ 球対称歪

理論式

$$\tau^F = \left(\frac{F_{\text{max}}}{2\Gamma} \right)^{3/2} \left(\frac{2\Gamma}{b^2} \right) c^{1/2}$$

$c^{1/2}$ 則



Labuschモデル

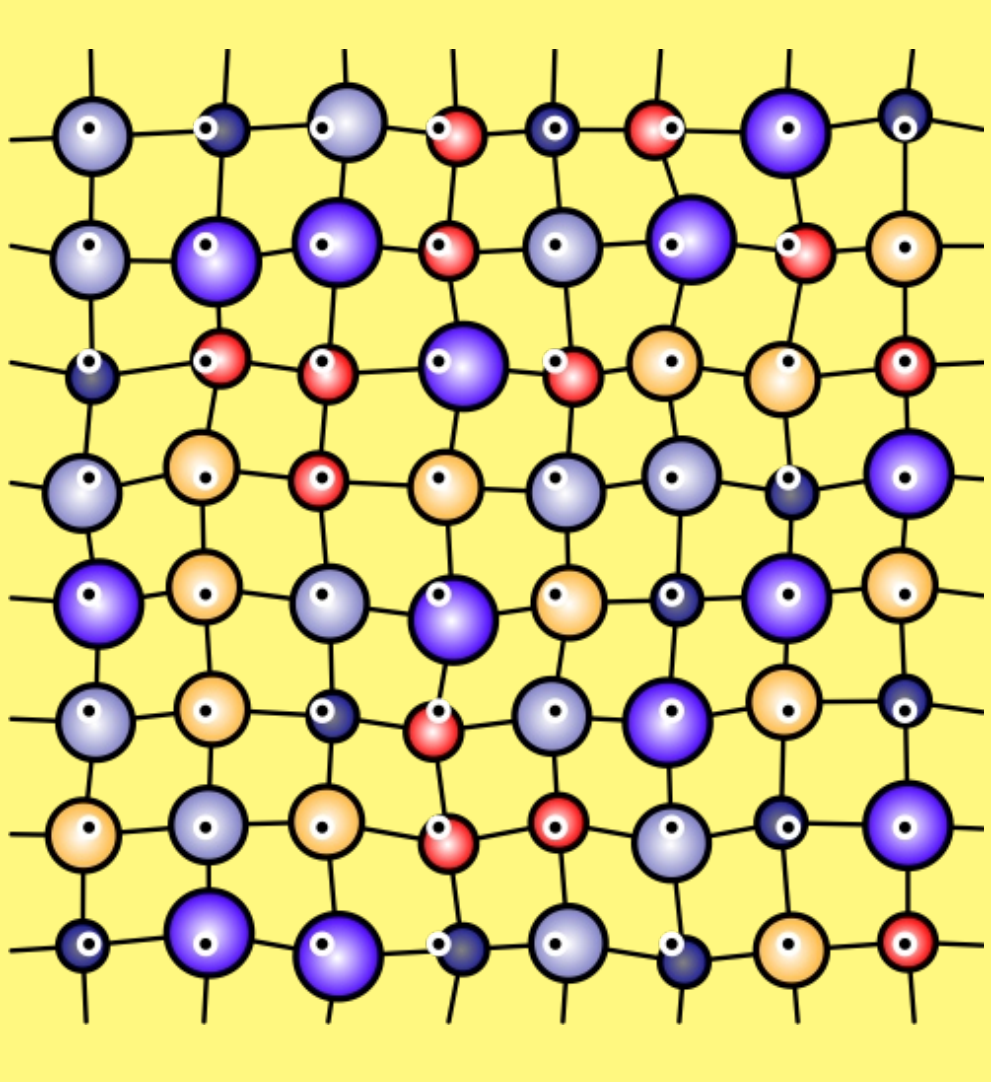
希薄合金

(固溶度 $c = 0.1 \sim \text{数 at.}\%$)

- ・ 複数個の溶質原子集団による歪場の重なり

$$\tau^L = \left(\frac{U_{\text{max}}^4}{w\Gamma b^9} \right)^{1/3} c^{2/3}$$

$c^{2/3}$ 則



ハイエントロピー合金

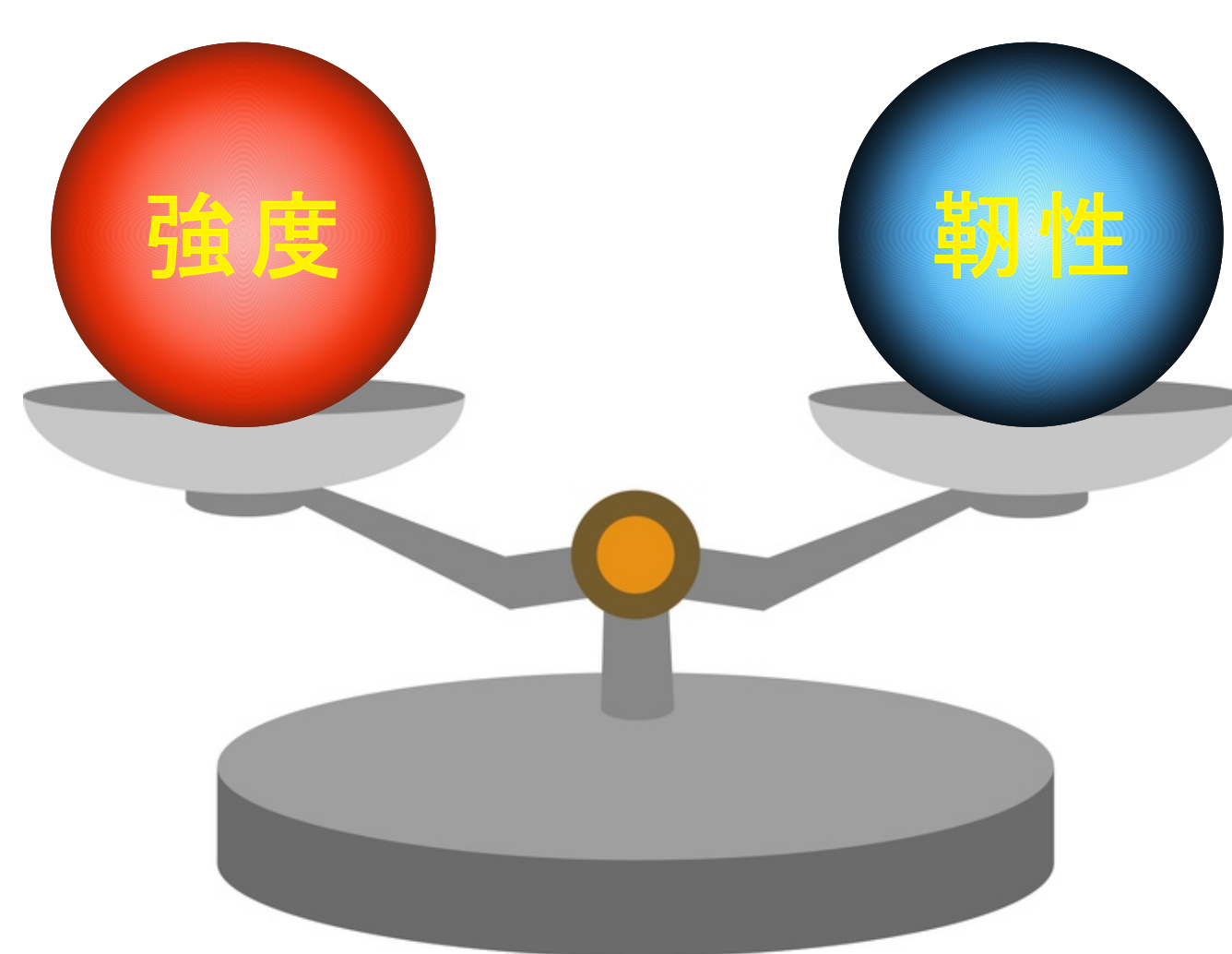
等原子量合金

$A_{20}B_{20}C_{20}D_{20}E_{20}$

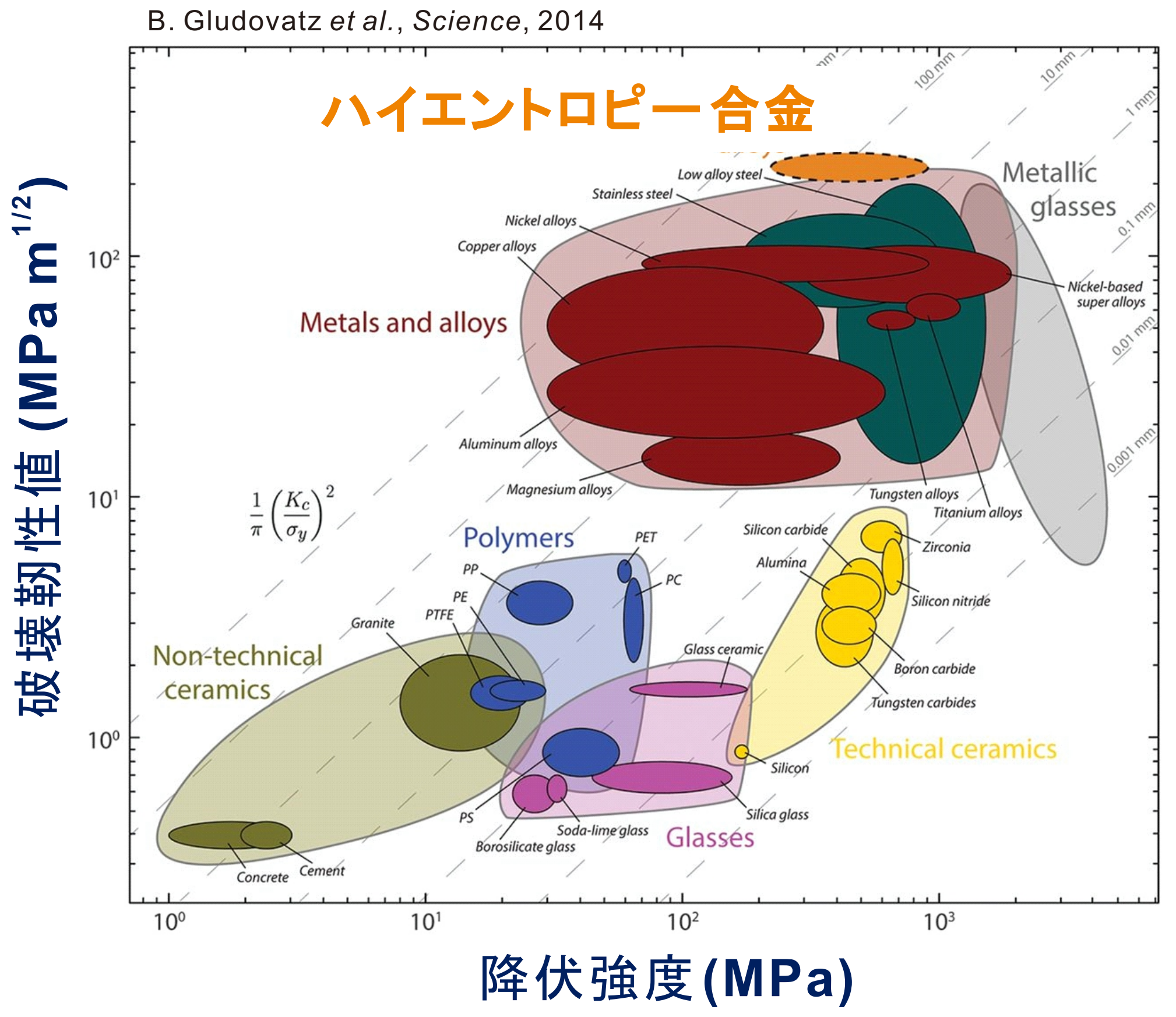
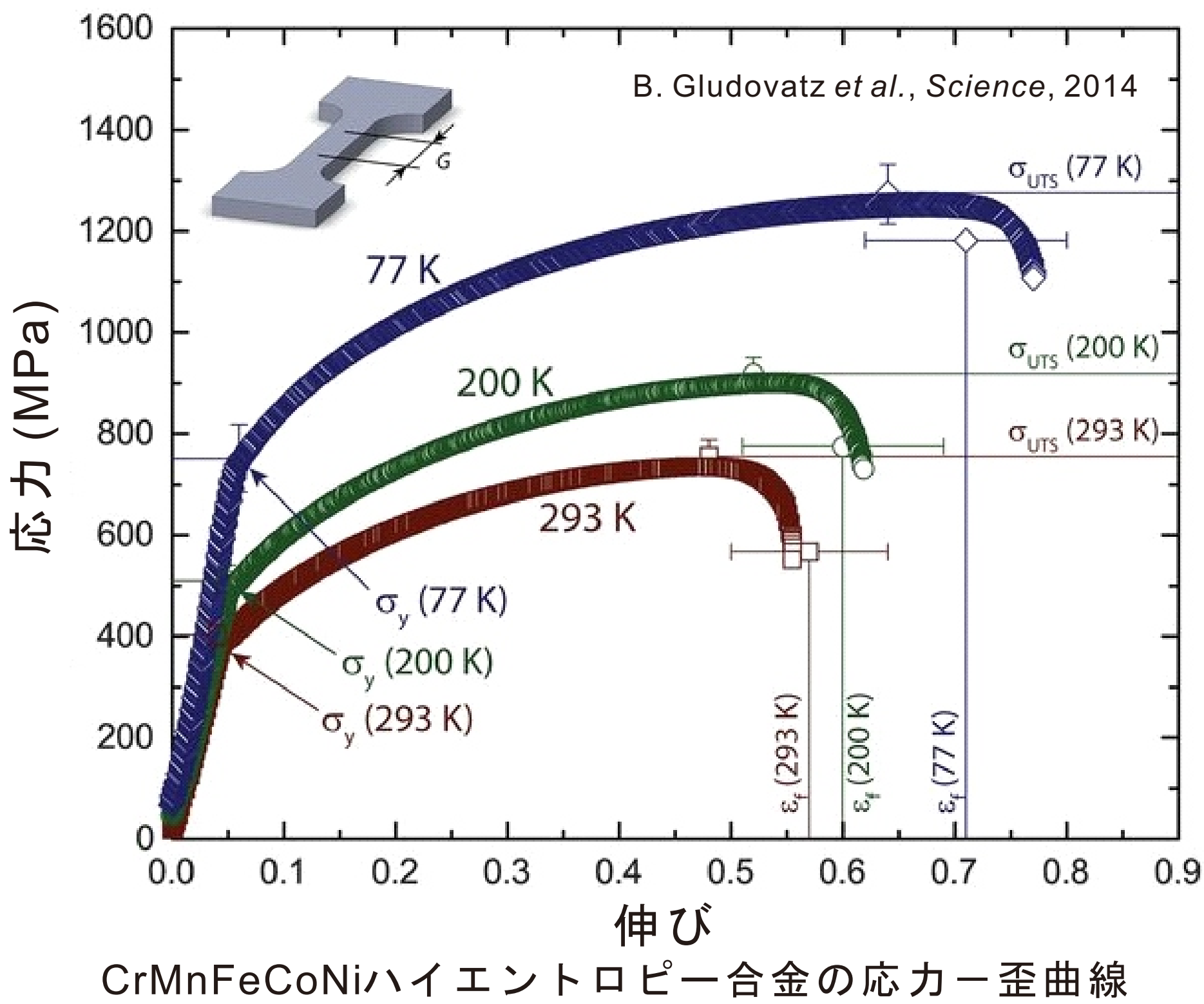
- ・ 溶質/溶媒の区別が不可
- ・ 複雑な歪場

従来理論では
立式不可能

特徴3:トレードオフの打破:強くてしなやかな夢の材料

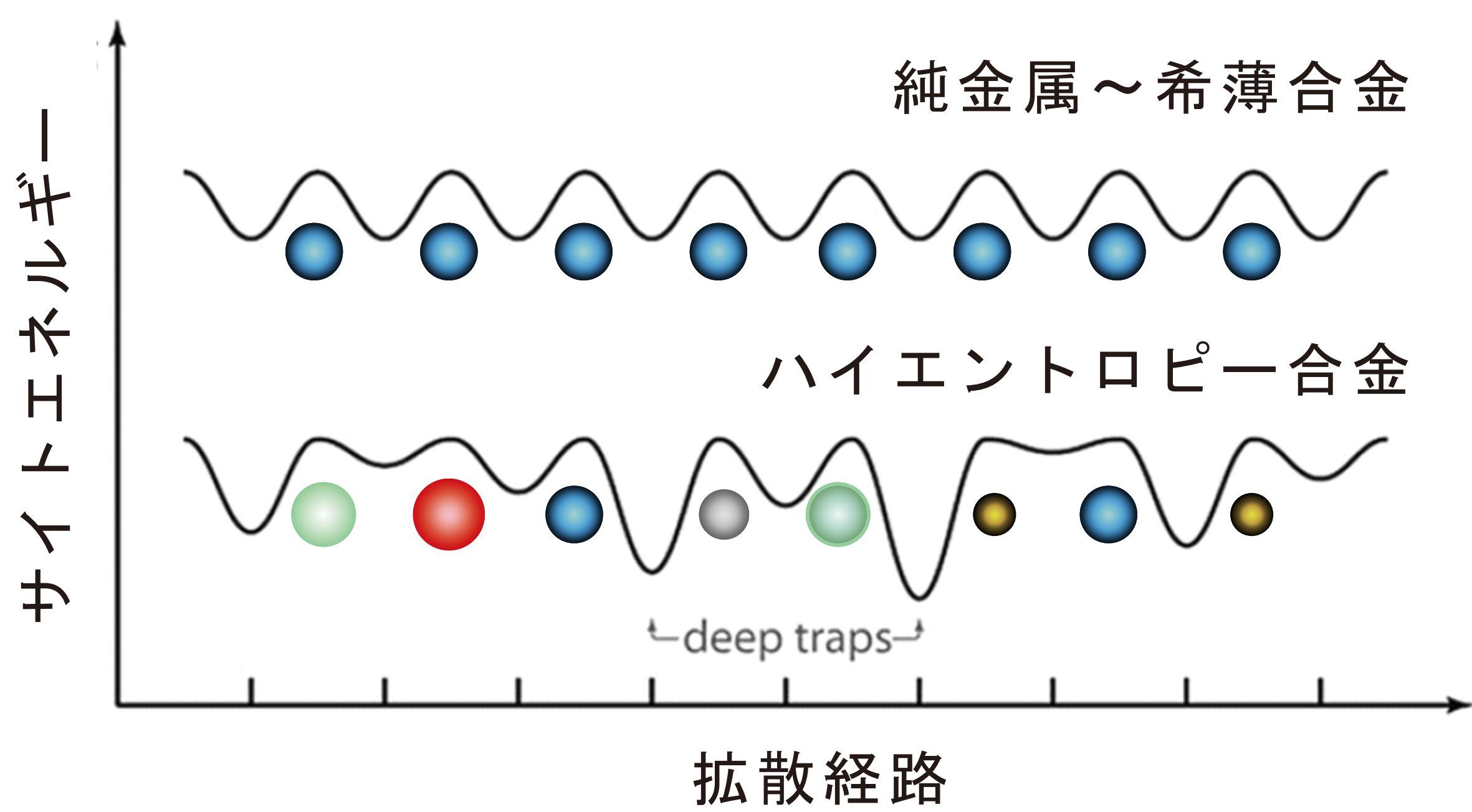
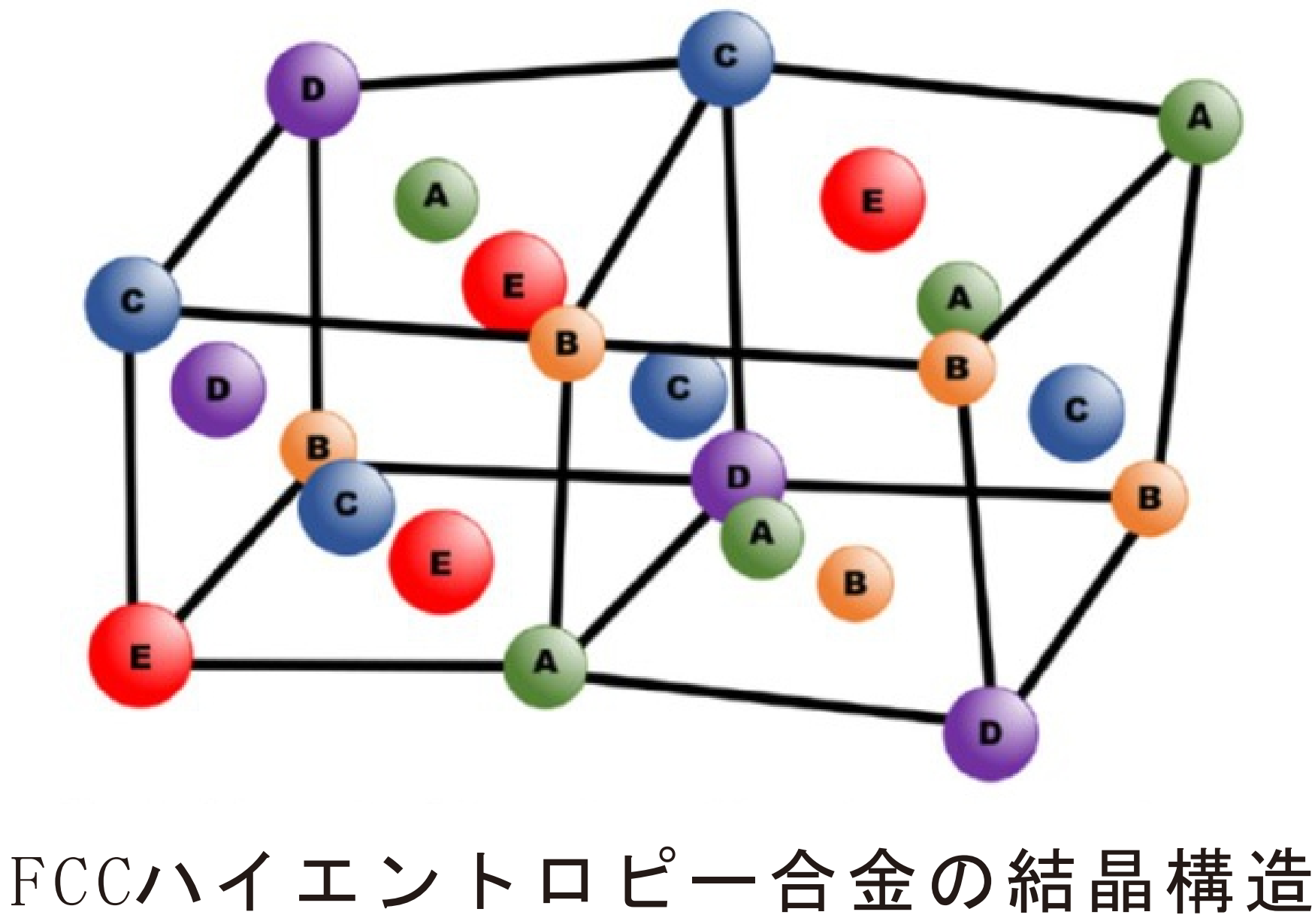


『強くてしなやかな材料』
に求められる強度と韌性の
両立は困難とされてきた



極度に歪んだ結晶格子による材料強化
→ **Ni基超合金なみの強度** & **金属系材料最高クラスの破壊靱性値**を実現

特徴4:トラップ効果による遅い原子拡散



多様な原子サイズ、ランダムな配置によって生まれた局所的に深いエネルギーのサイトにトラップされる

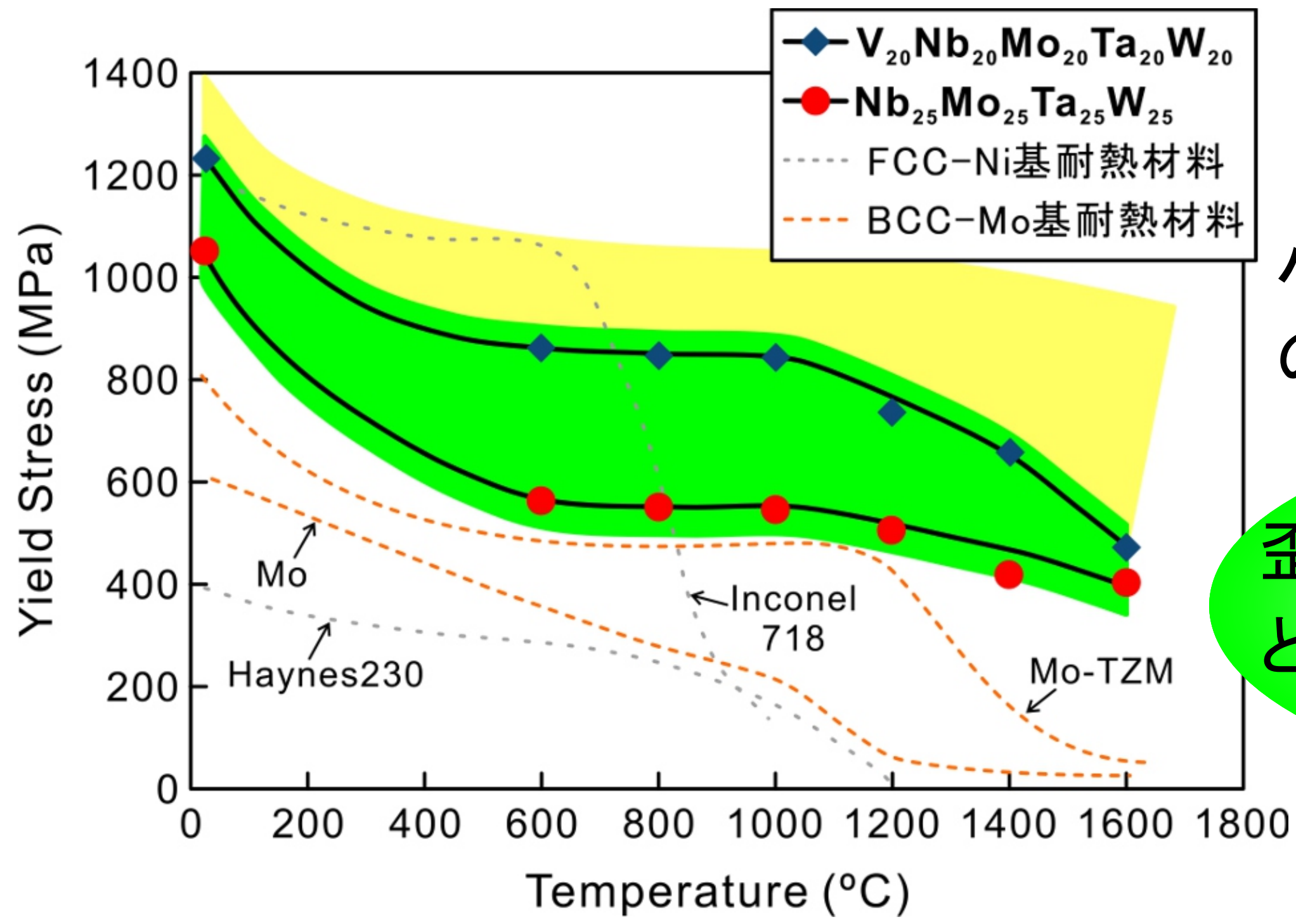
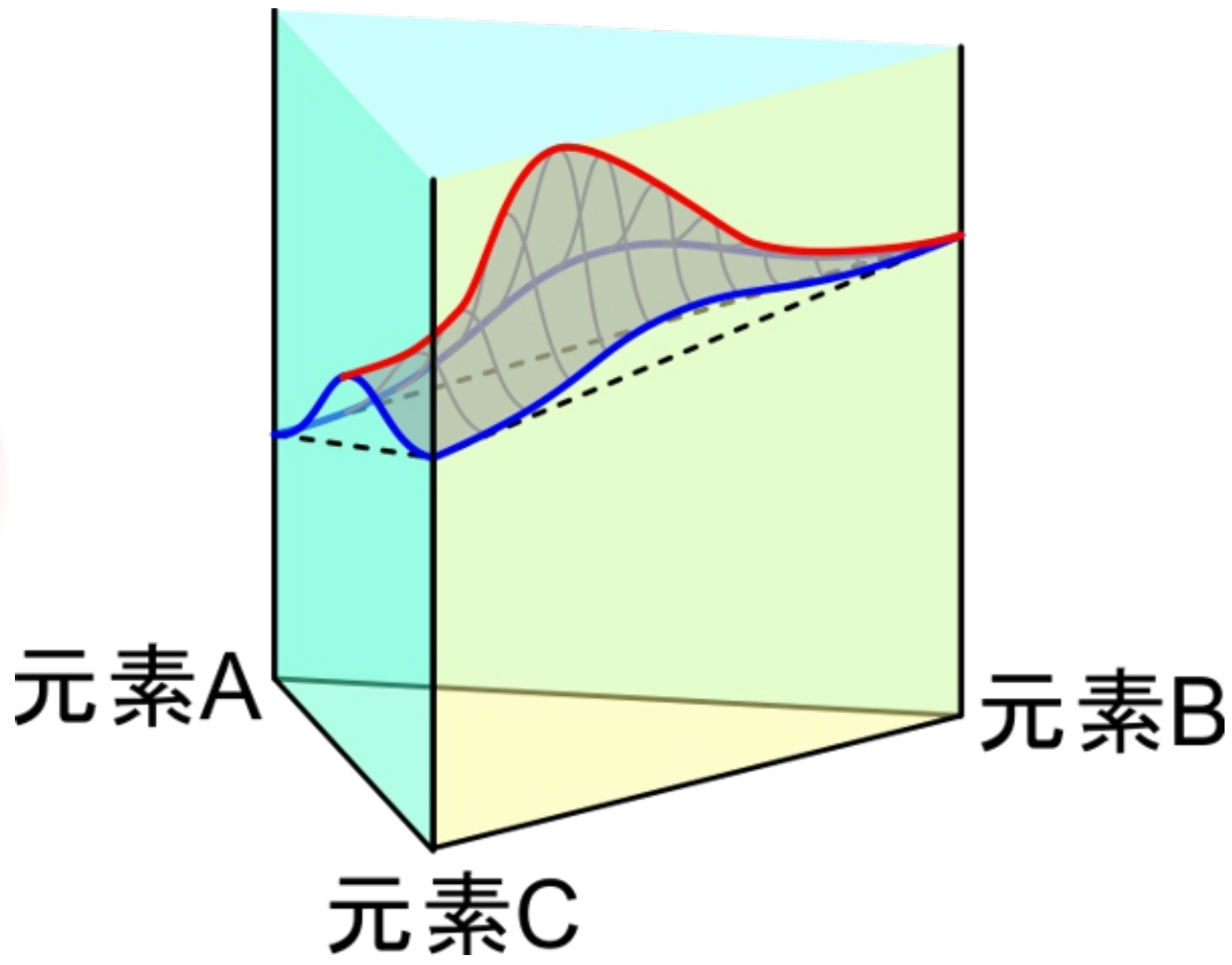
遅い原子拡散

材料の高温使用や
長寿命化に有利

特徴5:物性発現のカクテル効果

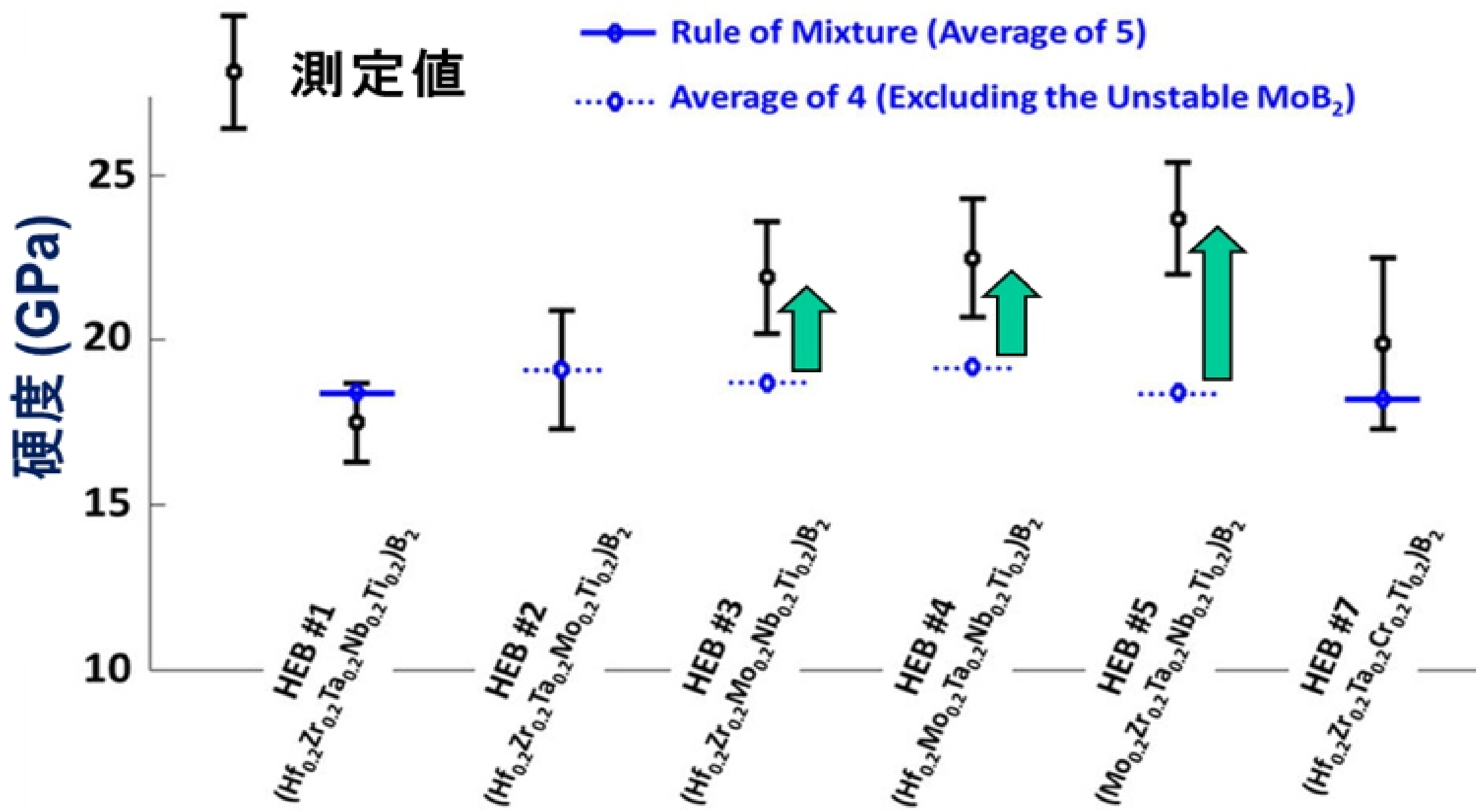
カクテル効果とは

混合則による
予測値を上回る
物性の発現



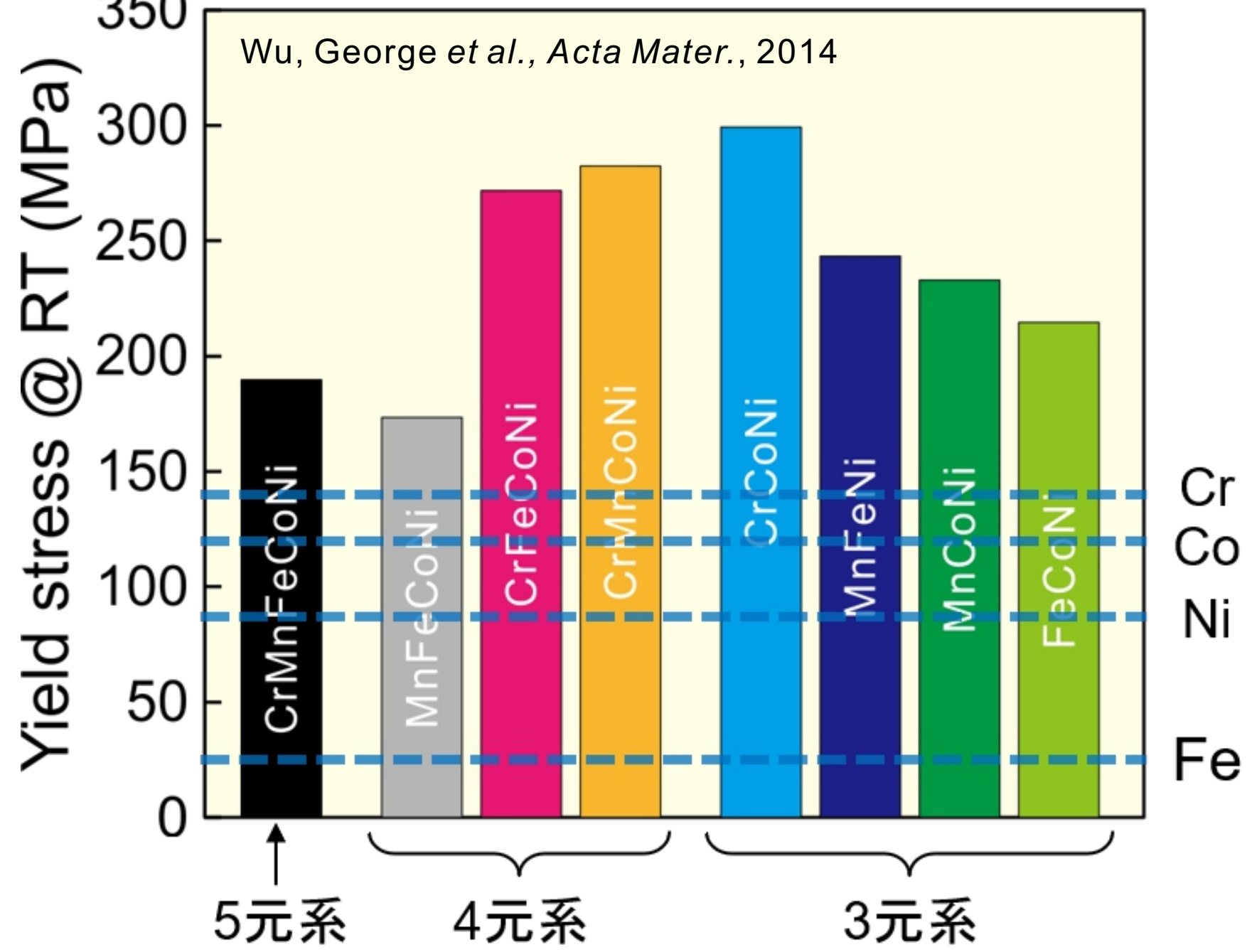
歪んだ結晶格子による強化
とトラップ効果による耐熱化

ハイレントロピー金属ボライドの硬度



単純混合則による
推定値をはるかに
上回る硬度

ハイレントロピーFCC合金の降伏強度

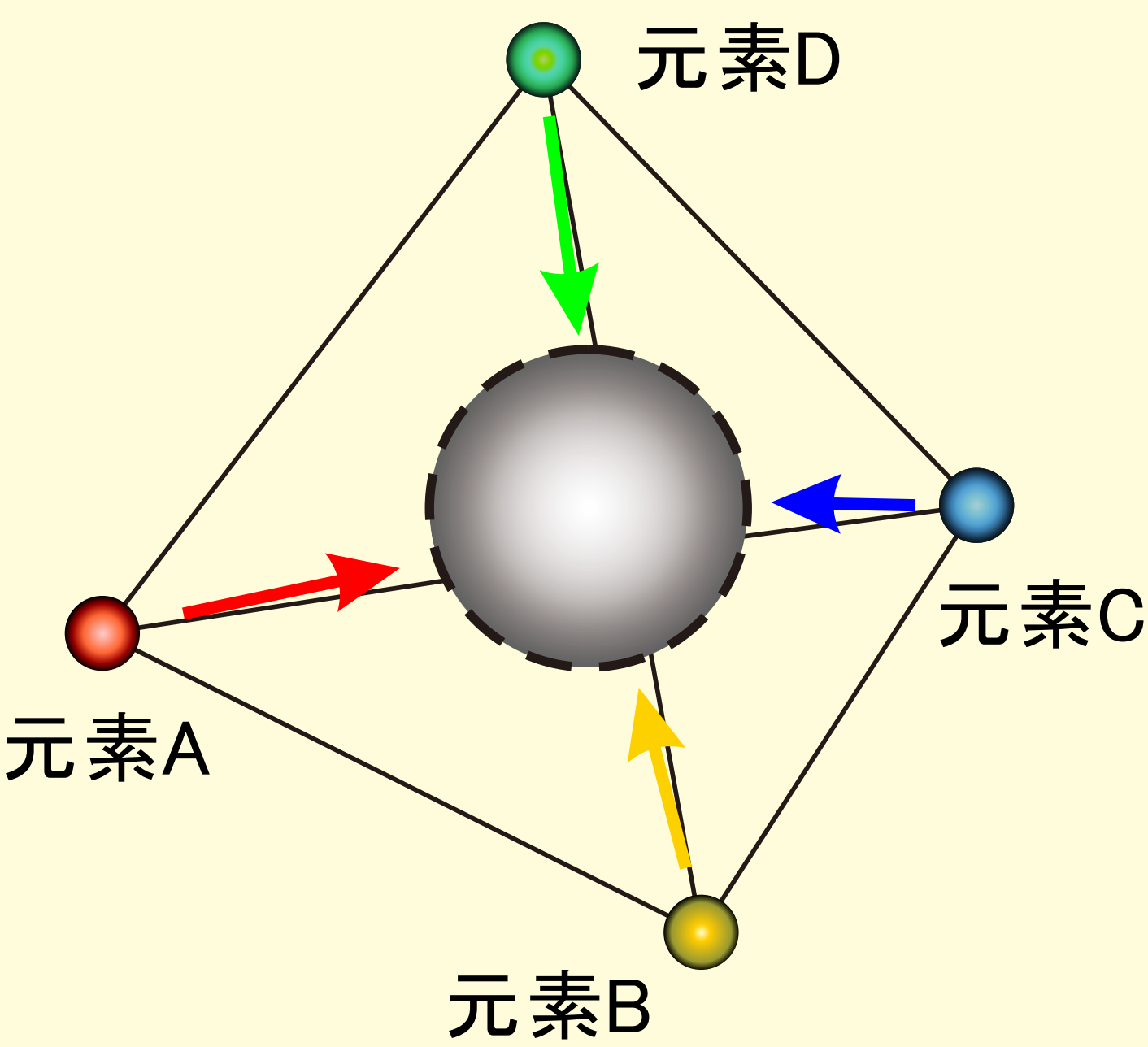


どの構成元素よりも
優れた降伏強度を示す

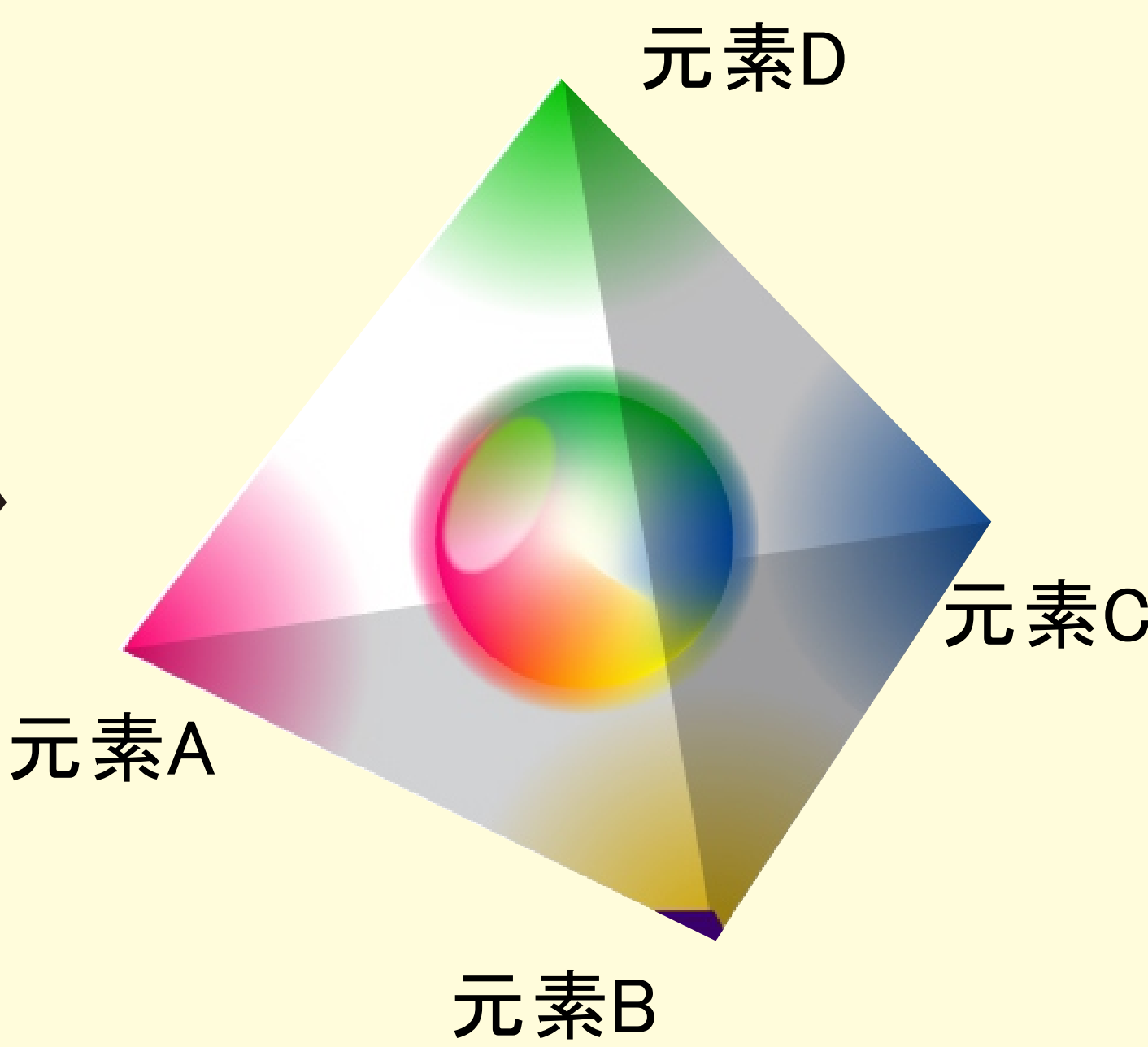
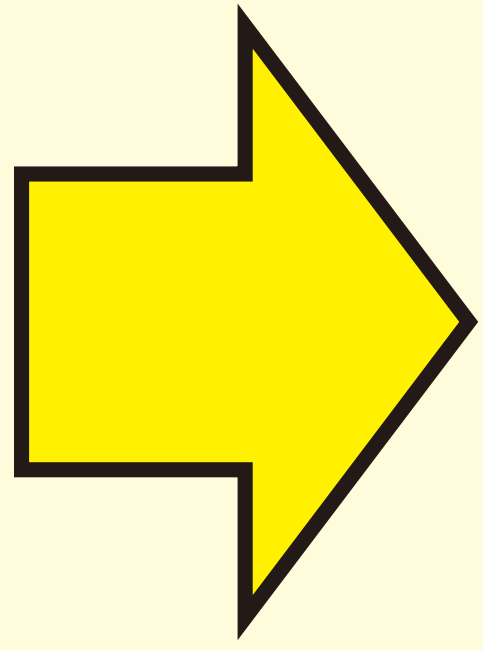
CoCrNi合金が最も優れている

『より多くの元素を
混ぜればより強くなる』
というわけではなく、
組み合わせの最適化が必要

メタラジー(合金設計)のパラダイムシフト



従来のメタラジー
純元素をスタートとする
『足し合わせ』の概念



新しいメタラジー
多元素混合状態を
スタートとする
『差し引き』の概念